

# MOVIMIENTO PROTÓNICO EN UN SÓLIDO MOLECULAR<sup>1</sup>

Elena Forcén Vázquez

*Dpto. de Química Inorgánica e I.C.M.A. U. de Zaragoza - C.S.I.C. Pedro Cerbuna 12,*

*E-50009 (Spain). elenafv@unizar.es*

La transferencia protónica y el movimiento de pequeñas moléculas en el interior de espacios reducidos es un tema que ha atraído el interés de numerosas áreas de investigación. Un ejemplo son las acuaporinas<sup>2</sup>, una clase de proteínas transmembrana implicadas en el transporte de moléculas de agua a través de mecanismos complejos. El diseño de nuevos materiales ha permitido la obtención de sustancias sintéticas no porosas capaces de ceder y capturar pequeñas moléculas, entre las cuales se encuentra el agua<sup>3</sup>. Estos procesos, que implican en numerosas ocasiones la ruptura y formación de enlaces a través de reacciones químicas dentro del sólido, lo convierten en algo más que un simple espectador<sup>4</sup>. Se ha observado que el transporte de protones a través de un sólido no necesita la presencia permanente de canales o poros. Este proceso, conocido como alambre de protones, se explica en base al mecanismo de Grotthuss, el cual consta de dos pasos fundamentales, el salto de un protón desde una molécula de agua a otra vecina y una posterior reorientación de las especies implicadas que deje al sistema listo para un siguiente ciclo<sup>5</sup>. A pesar de que la idea que inspiró dicho mecanismo fue postulada hace más 200 años y de su simplicidad conceptual, la mayoría de trabajos relacionados se basan en cálculos teóricos. Se han logrado evidencias experimentales, pero a día de hoy, la comparación con cálculos teóricos sigue siendo necesaria.

El trabajo que se presenta se centra en el estudio de un polímero 1-D basado en manganeso y citrato que presenta en su estructura de 21 moléculas de agua coordinadas a manganeso y 9 más que se encuentran libres entre las cadenas poliméricas. A pesar de no presentar canales o poros en su estructura, el compuesto experimenta una pérdida de tres moléculas de agua libre cuando se deja al aire. Del mismo modo, al exponerlo a una atmósfera húmeda, se produce la reabsorción de estas tres moléculas de agua, regenerándose la estructura inicial. El estudio de este proceso reversible mediante difracción de neutrones en el Instituto Laue-Langevin (ILL) reveló que cuando la rehidratación se lleva a cabo bajo atmósfera de D<sub>2</sub>O, se produce un intercambio total de H por D, lo que implica la ruptura de 52 enlaces covalentes preservando la cristalinidad de la muestra. El desorden observado en torno a las moléculas de agua, permite su desdoblamiento en dos componentes que encajan con la representación de los dos pasos implicados en el mecanismo de Grotthuss. Estos resultados permiten la descripción del mecanismo de forma inequívoca a partir de datos experimentales exclusivamente y suponen el primer ejemplo de transporte protónico en un sólido molecular.

## Referencias

- [1]Capelli, S. C. *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* 52, 50, 13107–13476 (2013).
- [2]Murata, K. *et al.* *Nature* 407, 599-605 (2000).
- [3]Thallapally, P. K. *et al.* *Nature Materials* 7, 146-150 (2008); Leong, W. L. and Vittal, J. J. *Chem. Rev.* 111, 688-764 (2011).
- [4]Coronado, E. *et al.* *Nature Communications* 3, 828 (2012); Libri, S. *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* 47, 1693-1697 (2008); Supriya, S. and Das, S. K. *J. Am. Chem. Soc.* 129, 3464-3465 (2007); Campo, J. *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* 130, 2932-2933 (2008).
- [5]Nagle, J. F. and Morowitz, H. J. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 75, 298-302 (1978); Ädelroth, P. *Biochimica et Biophysica Acta* 1757, 867-870 (2006); Grotthuss, C. J. T. *Ann. Chim.* 58, 54-73 (1806).

## Agradecimientos:

Financiación económica conseguida a través de: Ministerio de Ciencia e Innovación (Proyectos MAT2011-27233-C02-01 y MAT2011-27233-C02-02); Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER); CONSOLIDER-INGENIO en Nanociencia Molecular (CSD 2007-00010). EFV agradece al Ministerio de Educación la beca predoctoral bajo el programa “Becas y Contratos FPU” (referencia AP2009-4211); Diputación General de Aragón; Servicio General de Apoyo a la Investigación – SAI de la Universidad de Zaragoza.